# Conceitos de Cristalografia
# 1.2

- David Glotz

# • Eixos Helicoidais:

- **É a combinação de uma operação de Rotação(A2,A3,A4...) + Translação(t).**
- **Um <u>eixo de rotação unitário(A1)</u> ao combinado com uma translação t realiza-se na realidade só uma operação de translação. - Os eixos de rotação helicoidal são caracterizados**

**como isogônicos (do grego, i.e. que possuem os mesmos**

**Ângulos) com os eixos de rotação.**

- **Os eixos de rotação helicoidal também possuem sua própria representação gráfica.**
- **Utiliza-se subscritos nos números que ao invertidos**

**Representam a translação t realizada. Ex: 21**

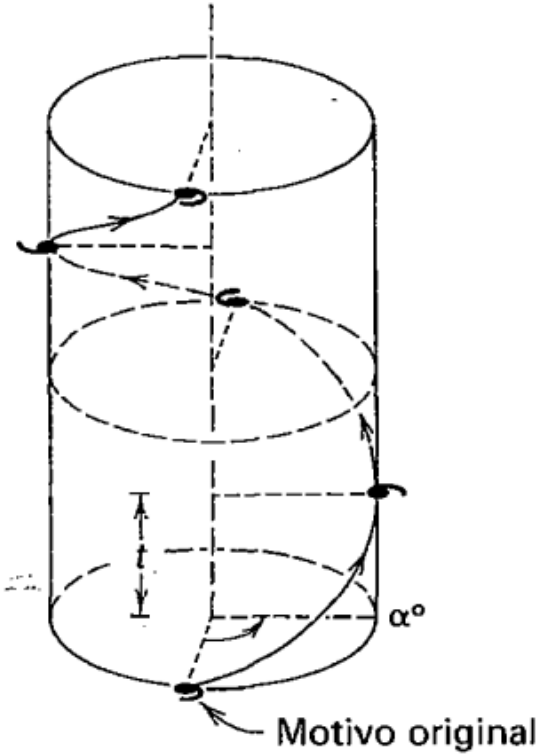
**significando que a translação realiada foi 1/2t.**

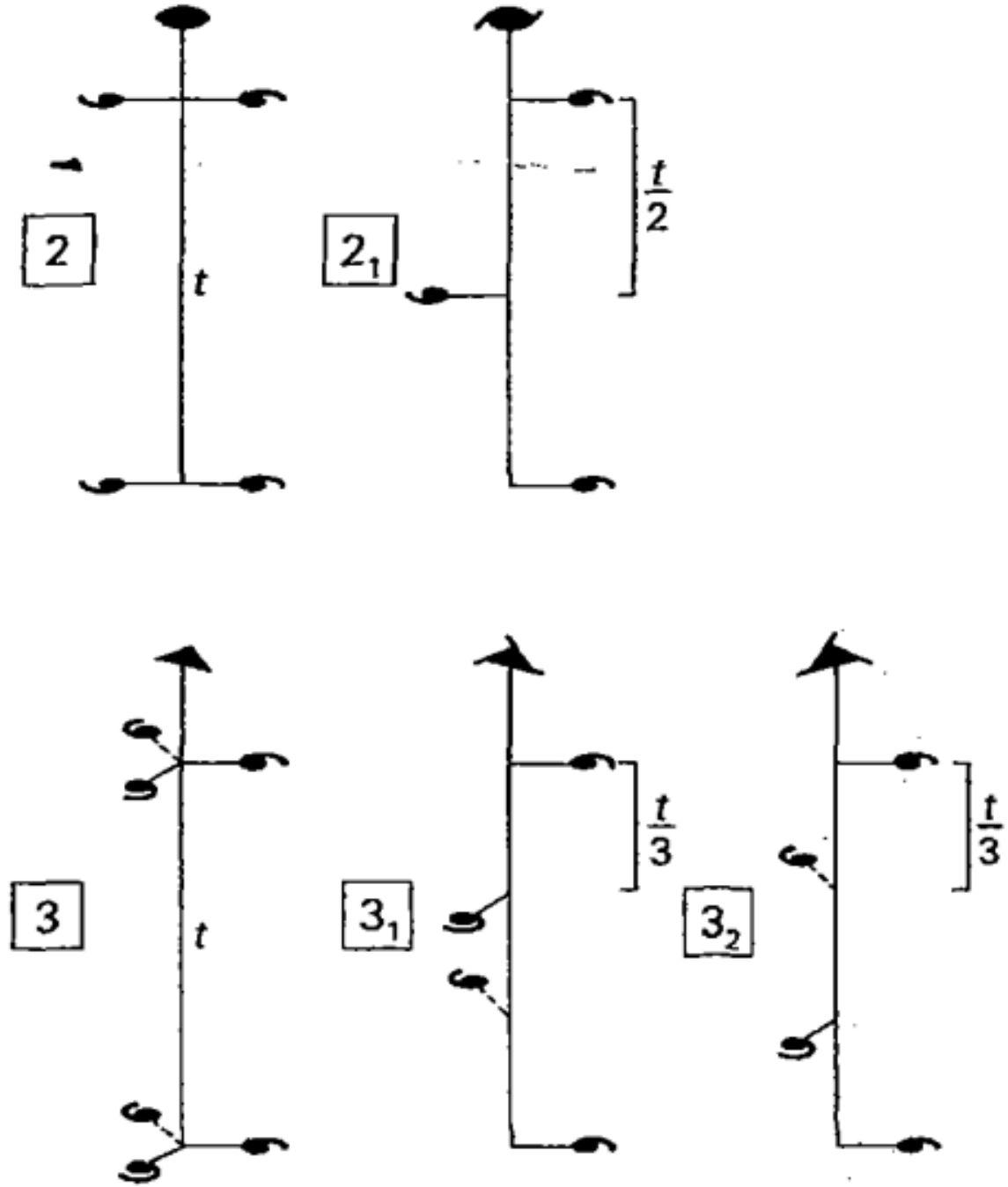
- **Quando a razão dos subscritos é < ½ é considerada dextrógira. Quando**

**>½ sinistrógera e quando = ½ direção neutra. Onde dextrógira= rotação em sentido horário**

**Sinistrógera = rotação em sentido anti-horário e direção neutra = o motivo para no mesmo**

**Independentemente da rotação realizada.**




2
t
2₁
t/2
3
t
3₁
t/3
3₂
t/3

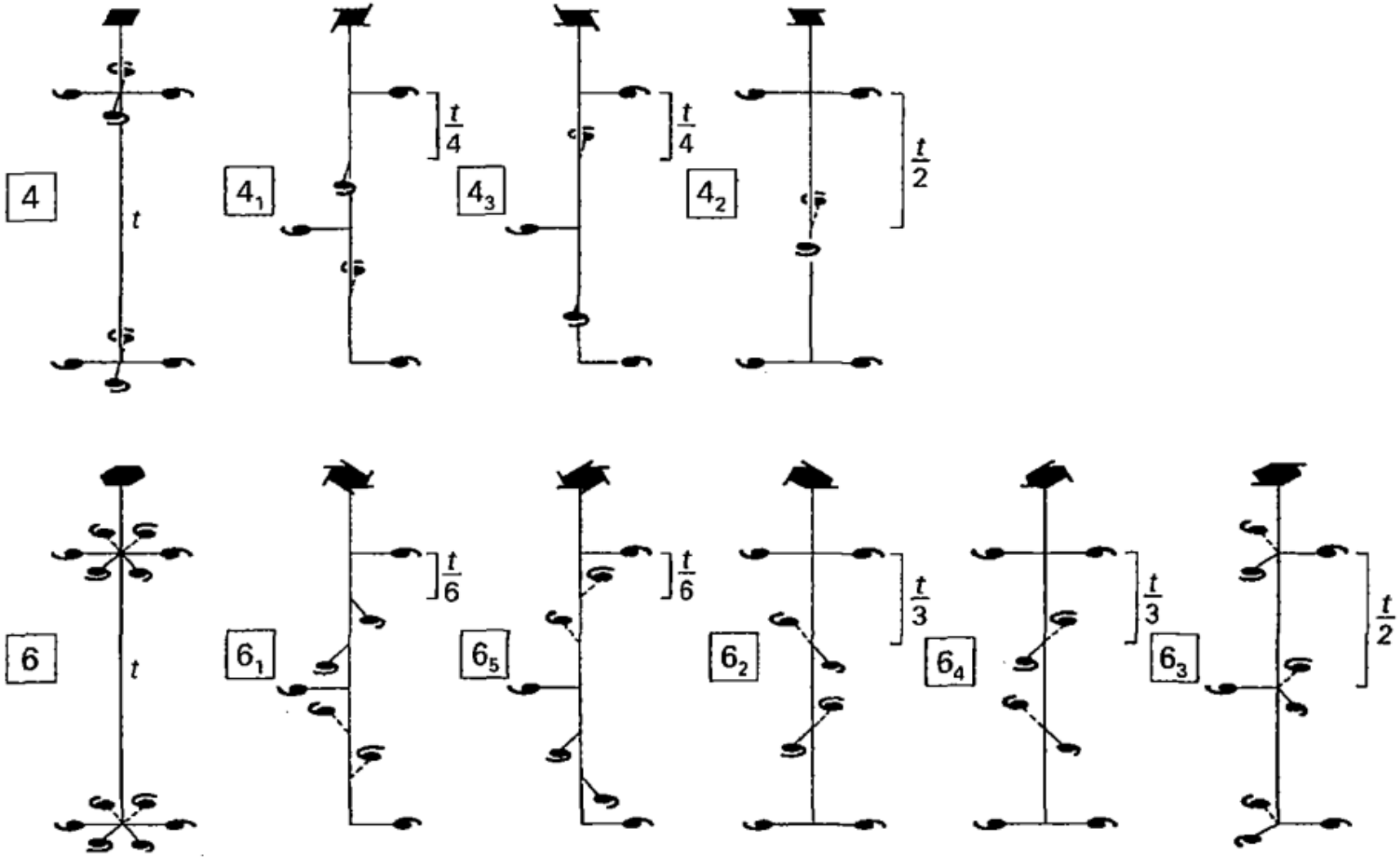



**FIGURA 7.21** Repetição de motivos-unitários por eixos helicoidais para quatro diferentes simetrias rotacionais. A coluna da esquerda representa os eixos de rotação e as da direita representam eixos helicoidais diagonais. Os símbolos no topo dos eixos de rotação e helicoidais são aceitos internacionalmente. Para as projeções dessas operações helicoidais, ver a Fig. 9.40.

**TABELA 9.3** Símbolos dos eixos de simetria (todos os símbolos gráficos são para eixos normais à página, salvo indicação em contrário)

| Símbolo | Eixos de simetria | Símbolo gráfico | | Tipo de translação (se houver) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Rotação unitária | Nenhuma | | Nenhuma |
| $\bar{1}$ | Inversão rotatória unitária | ° | | Nenhuma |
| 2 | Rotação binária | ⬮ → (paralelo à página) | | Nenhuma |
| $2_1$ | Helicoidal binário | ⬮ | | $\frac{1}{2}c$ $\frac{1}{2}a$ ou $\frac{1}{2}b$ |
| 3 | Rotação ternária | ▲ | | Nenhuma |
| $3_1$ | Helicoidal ternário (à direita) | ▲ | 6 | $\frac{1}{3}c$ |
| $3_2$ | Helicoidal ternário (à esquerda) | ▲ | 6 | $\frac{2}{3}c$ |
| $\bar{3}$ | Inversão rotatória ternária | △ | | Nenhuma |
| 4 | Rotação quaternária | ■ | | Nenhum |
| $4_1$ | Helicoidal quaternário (à direita) | ▀ | | $\frac{1}{2}c$ |
| $4_2$ | Helicoidal quaternário (neutro) | ▀ | | $\frac{2}{4}c = \frac{1}{2}$ |
| $4_3$ | Helicoidal quaternário (à esquerda) | ▀ | | $\frac{3}{4}c$ |
| $\bar{4}$ | Inversão rotatória quaternária | ◪ | | Nenhum |
| 6 | Rotação senária | ⬢ | | Nenhum |
| $6_1$ | Helicoidal senário (à direita) | ⬢ | | $\frac{1}{6}c$ |
| 2 | Helicoidal senário (à direita) | ⬢ | | $\frac{2}{6}c$ |
| 3 | Helicoidal senário (neutro) | ⬢ | | $\frac{3}{6}c = \frac{1}{2}$ |
| $6_4$ | Helicoidal senário (à esquerda) | ⬢ | | $\frac{4}{6}c$ |
| $6_4$ | Helicoidal senário (à esquerda) | ⬢ | | $\frac{5}{6}c$ |
| $\bar{6}$ | Inversão rotatória senária | ⬢ | | Nenhum |

- # Planos de deslizamento:

- **É a combinação de uma operação de Reflexão(m) + Translação(t) i.e. (m+t) . Chama-se de operação de delizamento ou reflexão de deslizamento.**
- **O deslizamento sendo paralelo a um dos eixos cristalográficos receberá o nome do seu respectivo eixo o qual é paralelo. Ex: Deslizamento a , Deslizamento b e Deslizamento c.**
- **a/2 + b/2 , a/2 + c/2 , b/2 + c/2 ... Representam um deslizamento diagonal (n).**
- **a/4 + b/4, b/4 + c/4, a/4 + c/4 ... Representam um deslizamento diamante (d).**

**TABELA 7.3** Nomenclatura de operações de simetria envolvendo translação

| Nome | Operações de simetria translacional | Notação de Hermann-Mauguin |
|---|---|---|
| Eixo de rotação helicoidal | Rotação + Translação | $2_1$; $3_1$; $3_2$*; $4_1$; $4_3$; $4_2$; $6_1$; $6_5$; $6_2$; $6_4$; $6_3$ |
| Plano de deslizamento | Reflexão + Translação | *a*, *b*, *c*, *d*, *n* |

* Pares enantiomórficos estão agrupados conjuntamente.

- # Os 230 Grupos Espaciais:

**TABELA 7.4** Os 230 grupos espaciais e as 32 classes de cristais (grupos pontuais) isogônicos. Os símbolos dos grupos espaciais não estão abreviados, em geral*

| Classe cristalina | Grupo espacial |
|---|---|
| 1 | $P1$ |
| $\bar{1}$ | $P\bar{1}$ |
| 2 | $P2$, $P2_1$, $C2$ |
| $m$ | $Pm$, $Pc$, $Cm$, $Cc$ |
| $2/m$ | $P2/m$, $P2_1/m$, $C2/m$, $P2/c$, $P2_1/c$, $C2/c$ |
| 222 | $P222$, $P222_1$, $P2_12_12$, $P2_12_12_1$, $C222_1$, $C222$, $F222$, $I222$, $I2_12_12_1$ |
| $mm2$ | $Pmm2$, $Pmc2_1$, $Pcc2$, $Pma2$, $Pca2_1$, $Pnc2$, $Pmn2_1$, $Pba2$, $Pna2_1$, $Pnn2$, $Cmm2$, $Cmc2_1$, $Ccc2$, $Amm2$, $Abm2$, $Ama2$, $Aba2$, $Fmmc$, $Fdd2$, $Imm2$, $Iba2$, $Ima2$ |
| $2/m2/m2/m$ | $P2/m2/m2/m$, $P2/n2/n2/n$, $P2/c2/c2/m$, $P2/b2/a2/n$, $P2_1/m2/m2/a$, $P2/n2_1/n2/a$, $P2/m2/n2_1/a$, $P2_1/c2/c2/a$, $P2_1/b2_1/a2/m$, $P2_1/c2_1/c2/n$, $P2/b2_1/c2_1/m$, $P2_1/n2_1/n2/m$, $P2_1/m2_1/m2/n$, $P2_1/b2/c2_1/n$, $P2_1/b2_1/c2_1/a$, $P2_1/n2_1/m2_1/a$, $C2/m2/c2/m$, $C2/m2/c2_1/a$, $C2/m2/m2/m$, $C2/c2/c2/m$, $C2/m2/m2/a$, $C2/c2/c2/a$, $F2/m2/m2/m$, $F2/d2/d2/d$, $I2/m2/m2/m$, $I2/b2/a2/m$, $I2/b2/c2/a$, $I2/m2/m2/a$ |
| 4 | $P4$, $P4_1$, $P4_2$, $P4_3$, $I4$, $I4_1$ |
| $\bar{4}$ | $P\bar{4}$, $I\bar{4}$ |
| $4/m$ | $P4/m$, $P4_2/m$, $P4/n$, $P4_2/n$, $I4/m$, $I4_1/a$ |
| 422 | $P422$, $P42_12$, $P4_122$, $P4_12_12$, $P4_222$, $P4_22_12$, $P4_322$, $P4_32_12$, $I422$, $I4_122$ |
| $4/mm$ | $P4/mm$, $P4bm$, $P4_2cm$, $P4_2nm$, $P4cc$, $P4nc$, $P4_2mc$, $P4_2bc$, $I4mm$, $I4cm$, $I4_1md$, $I4_1cd$ |
| $\bar{4}2m$ | $P\bar{4}2m$, $P\bar{4}2c$, $P\bar{4}2_1m$, $P\bar{4}2_1c$, $P\bar{4}m2$, $P\bar{4}c2$, $P\bar{4}b2$, $P\bar{4}n2$, $I\bar{4}m2$, $I\bar{4}c2$, $I\bar{4}2m$, $I\bar{4}2d$ |
| $4/m2/m2/m$ | $P4/m2/m2/m$, $P4/m2/c2/c$, $P4/n2/b2/m$, $P4/n2/n2/c$, $P4/m2_1/b2/m$, $P4/m2_1/n2/c$, $P4/n2_1/m2/m$, $P4/n2_1/c2/c$, $P4_1/m2/m2/c$, $P4_2/m2/c2/m$, $P4_2/n2/b2/c$, $P4_2/n2/n2/m$, $P4_2/m2_1/b2/c$, $P4_2/m2_1/n2/m$, $P4_1/n2_1/m2/c$, $P4_2/n2_1/c2/m$, $I4/m2/m2/m$, $I4/m2/c2/m$, $I4_1/a2/m2/d$, $I4_1/a2/c2/d$ |
| 3 | $P3$, $P3_1$, $P3_2$, $R3$ |
| $\bar{3}$ | $P\bar{3}$, $R\bar{3}$ |
| 32 | $P312$, $P321$, $P3_112$, $P3_121$, $P3_212$, $P3_221$, $R32$ |
| $3m$ | $P3m1$, $P31m$, $P3c1$, $P31c$, $R3m$, $R3c$ |
| $\bar{3}2/m$ | $P\bar{3}1m$ $P\bar{3}1c$ $P\bar{3}m1$ $P\bar{3}c1$ $R\bar{3}m$ $R\bar{3}c$ |
| 6 | $P6$, $P6_1$, $P6_5$, $P6_2$, $P6_4$, $P6_3$ |
| $\bar{6}$ | $P\bar{6}$ |
| $6/m$ | $P6/m$, $P6_3/m$ |
| 622 | $P622$, $P6_122$, $P6_522$, $P6_222$, $P6_422$, $P6_322$ |
| $6mm$ | $P6mm$, $P6cc$, $P6_3cm$, $P6_3mc$ |
| $\bar{6}m2$ | $P\bar{6}m2$ $P\bar{6}c2$ $P\bar{6}2m$ $P\bar{6}2c$ |
| $6/m2/m2/m$ | $P6/m2/m2/m$, $P6/m2/c2/c$, $P6_3/m2/c2/m$, $P6_2/m2/m2/c$ |
| 23 | $P23$, $F23$, $I23$, $P2_13$, $I2_13$ |
| $2/m\bar{3}$ | $P2/m\bar{3}$, $P2/n\bar{3}$, $F2/m\bar{3}$, $F2/d\bar{3}$, $I2/m\bar{3}$, $P2_1/a\bar{3}$, $I2_1/a\bar{3}$ |
| 432 | $P432$, $P4_232$, $F432$, $F4_132$, $I432$, $P4_332$, $P4_132$, $I4_132$ |
| $\bar{4}3m$ | $P\bar{4}3m$, $F\bar{4}3m$, $I\bar{4}3m$, $P\bar{4}3n$, $F\bar{4}3c$, $I\bar{4}3d$ |
| $4/m\bar{3}2/m$ | $P4/m\bar{3}2/m$, $P4/n\bar{3}2/n$, $P4_2/m\bar{3}2/n$, $P4_2/n\bar{3}2/m$, $F4/m\bar{3}2/m$, $F4/m\bar{3}2/c$, $F4_1/d\bar{3}2/m$, $F4_1/d\bar{3}2/c$, $I4/m\bar{3}2/m$, $I4_1/a\bar{3}2/d$ |

* A partir de *International Tables for Crystallography*, 1983, v. A, T. Hahn, ed; *Space group symmetry*, International Union of Crystallography, Reidel Publ. Co.

# • Notação de Schoenflies:

- Notação para **grupos espaciais** menos utilizada em relação a notação de Hermann-Mauguin (notação internacional) .

**-Elementos de simetria** são denotados por **i** para centros de inversão, **C** para eixos de rotação próprios, **σ** para planos de espelho e **S** para eixos de rotação impróprios ( eixos de rotação-reflexão ). **C** e **S** são geralmente seguidos por um número subscrito (abstratamente denotado **n** ) que denota a ordem de rotação possível.

Pela convenção, o eixo de rotação própria de maior ordem é definido como o eixo principal. Todos os outros elementos de simetria são descritos em relação a ele. Um plano de espelho vertical (contendo o eixo principal) é denotado por $\sigma_v$ ; um plano de espelho horizontal (perpendicular ao eixo principal) é denotado por $\sigma_h$ .

Em três dimensões, há um número infinito de grupos de pontos, mas todos eles podem ser classificados em várias famílias.

- **$C_n$** (para cíclico ) tem um eixo de rotação *n* vezes.
  - **$C_{nh}$** é $C_n$ com a adição de um **plano de espelho (reflexão)** perpendicular ao eixo de rotação ( *plano horizontal* ).
  - **$C_{nv}$** é $C_n$ com a adição de *n* planos espelho contendo o eixo de rotação **( planos verticais ).**
- **$C_s$** denota um grupo com apenas plano espelho (de *Spiegel* , espelho alemão) e nenhum outro elemento de simetria.
- **$S_n$** (de *Spiegel* , espelho em alemão ) contém apenas um eixo de rotação-reflexão *n* vezes . O índice, *n* , deve ser par porque, quando ímpar, um eixo de rotação-reflexão *n* vezes é equivalente a uma combinação de um eixo de rotação *n* vezes e um plano perpendicular, portanto **$S_n = C_{nh}$ para n ímpar .**
- **$C_{ni}$** possui apenas um eixo de rotoinversão . Essa notação raramente é usada porque qualquer eixo de rotoinversão pode ser expresso como um eixo de rotação-reflexão: para *n* ímpar , $C_{ni} = S_{2n}$ e $C_{2ni} = S_n = C_{nh}$ , e para *n* par , $C_{2ni} = S_{2n}$ . Somente a notação $C_i$ (que significa $C_{1i}$ ) é comumente usada, e algumas fontes escrevem $C_{3i}$ , $C_{5i}$ etc.
- **$D_n$** (para diedro ou bilateral) tem um eixo de rotação *n* vezes mais *n* eixos duplos perpendiculares a esse eixo.
  - **$D_{nh}$** tem, além disso, um plano de espelho horizontal e, como consequência, também *n* planos de espelho verticais, cada um contendo o eixo *n* e um dos eixos duplos.
  - **$D_{nd}$** tem, além dos elementos de $D_n$ , *n* planos espelho verticais que passam entre eixos duplos ( *planos diagonais* ).
- ***T*** *(o grupo* tetraédrico quiral ) tem os eixos de rotação de um tetraedro (três eixos duplos e quatro eixos triplos).
  - **$T_d$** inclui planos espelhados diagonais (cada plano diagonal contém apenas um eixo duplo e passa entre outros dois eixos duplos, como em $D_{2d}$ ). Essa adição de planos diagonais resulta em três operações de rotação impróprias **$S_4$** .
  - $O_{plano}$ inclui três planos espelhados horizontais. Cada plano contém dois eixos duplos e é perpendicular ao terceiro eixo duplo, o que resulta no centro de inversão **i** .
- ***O*** *(o grupo* octaédrico quiral ) tem os eixos de rotação de um octaedro ou cubo (três eixos quádruplos, quatro eixos triplos e seis eixos diagonais duplos).
  - **$O_h$** inclui planos de espelho horizontais e, consequentemente, planos de espelho verticais. Contém também operações de centro de inversão e rotação imprópria.
- ***I*** *(o grupo* icosaédrico quiral ) indica que o grupo tem os eixos de rotação de um icosaedro ou dodecaedro (seis eixos de 5 dobras, dez eixos de 3 dobras e 15 eixos de 2 dobras).
  - **$I_h$** inclui planos de espelho horizontais e contém também operações de centro de inversão e rotação imprópria.

Os grupos espaciais com determinado grupo pontual são numerados por 1, 2, 3, ... (na mesma ordem do seu número internacional) e este número é adicionado como sobrescrito ao símbolo de Schönflies para o grupo pontual correspondente. Por exemplo, os grupos de números 3 a 5 cujo grupo pontual é $C_2$ têm o símbolo de Schönflies $C_2^1$, $C_2^2$, $C_2^3$.

**Arthur Moritz Schoenflies**

Carl Hermann

Charles-Victor Mauguin

# • Projeções de Cristais:

- **Projeçao esférica:**

- **Círculos grandes**
- **Círculos pequenos**

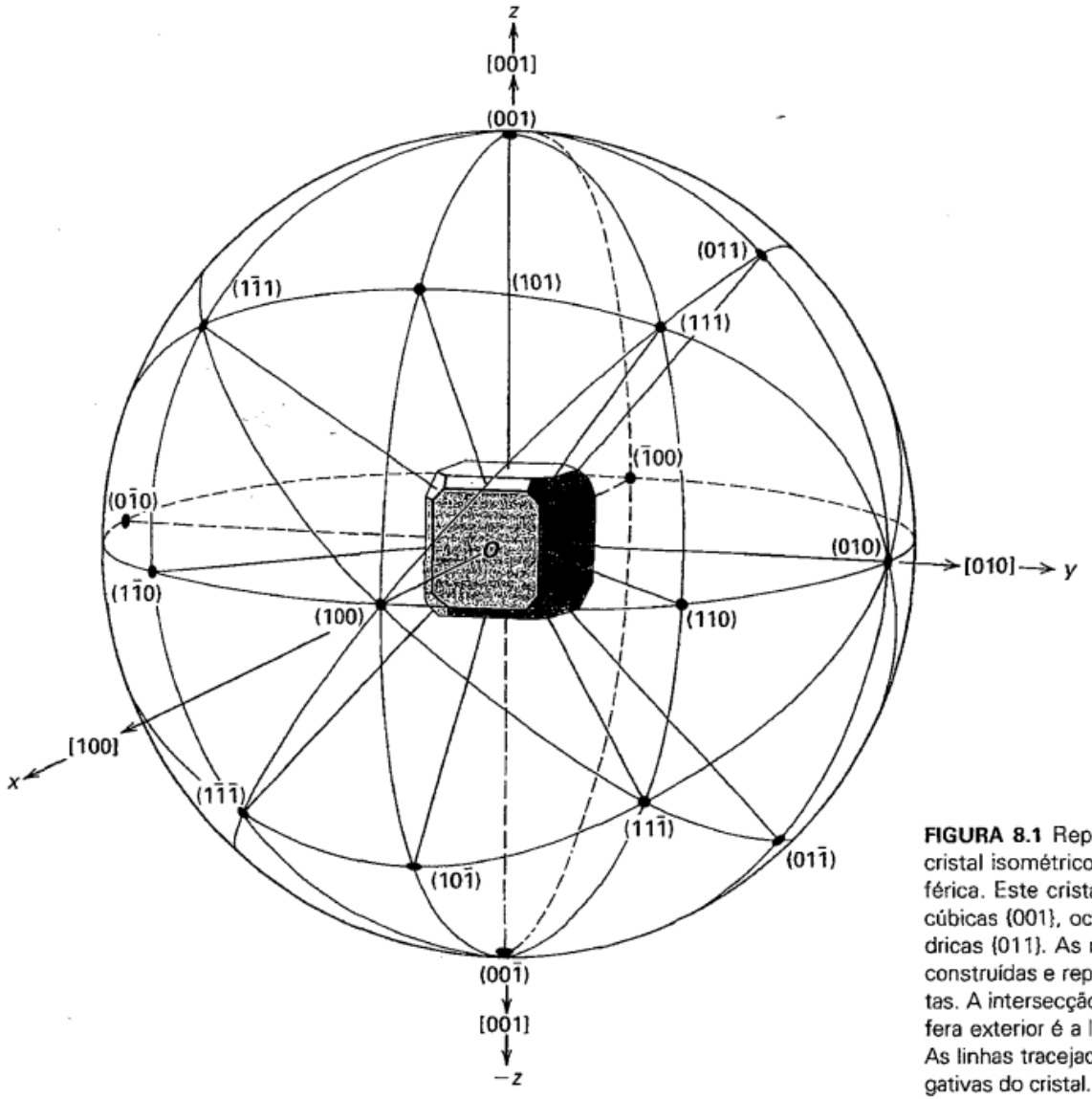
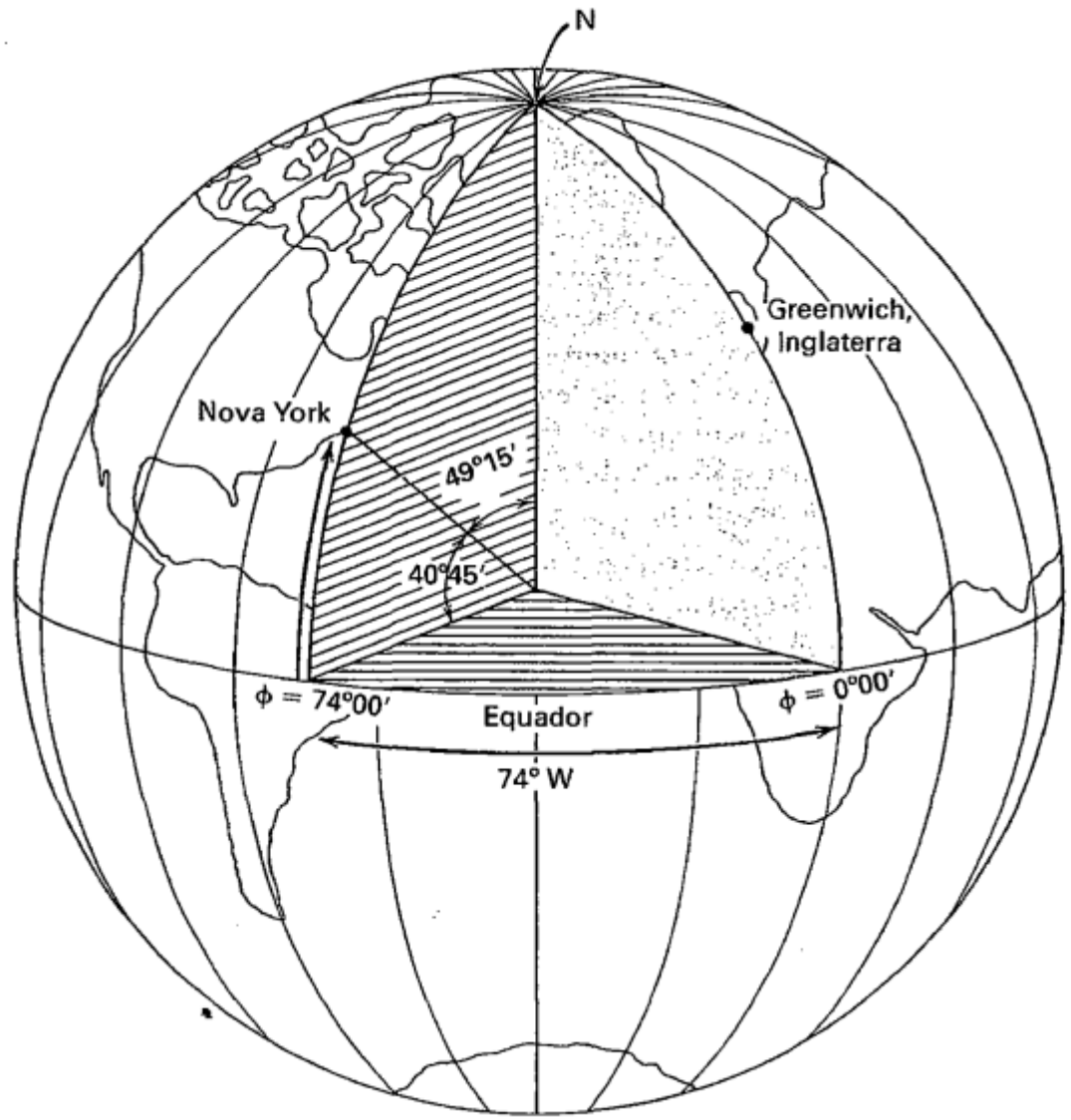



**FIGURA 8.1** Representação gráfica de um cristal isométrico usando uma projeção esférica. Este cristal mostra faces de formas cúbicas {001}, octaédricas {111} e dodecaédricas {011}. As normais a essas faces são construídas e representadas como linhas retas. A intersecção de cada normal com a esfera exterior é a localização do polo da face. As linhas tracejadas indicam as direções negativas do cristal.




A localização de qualquer ponto na esfera é especificada por meio de duas coordenadas esféricas angulares: um **ângulo polar**, **ρ**, medido a partir do polo norte, e um **azimute**, **ϕ**, medido em uma direção leste-oeste.

**FIGURA 8.2** Latitude e longitude medidas na cidade de Nova York.

- **Projeçao estereografica:**

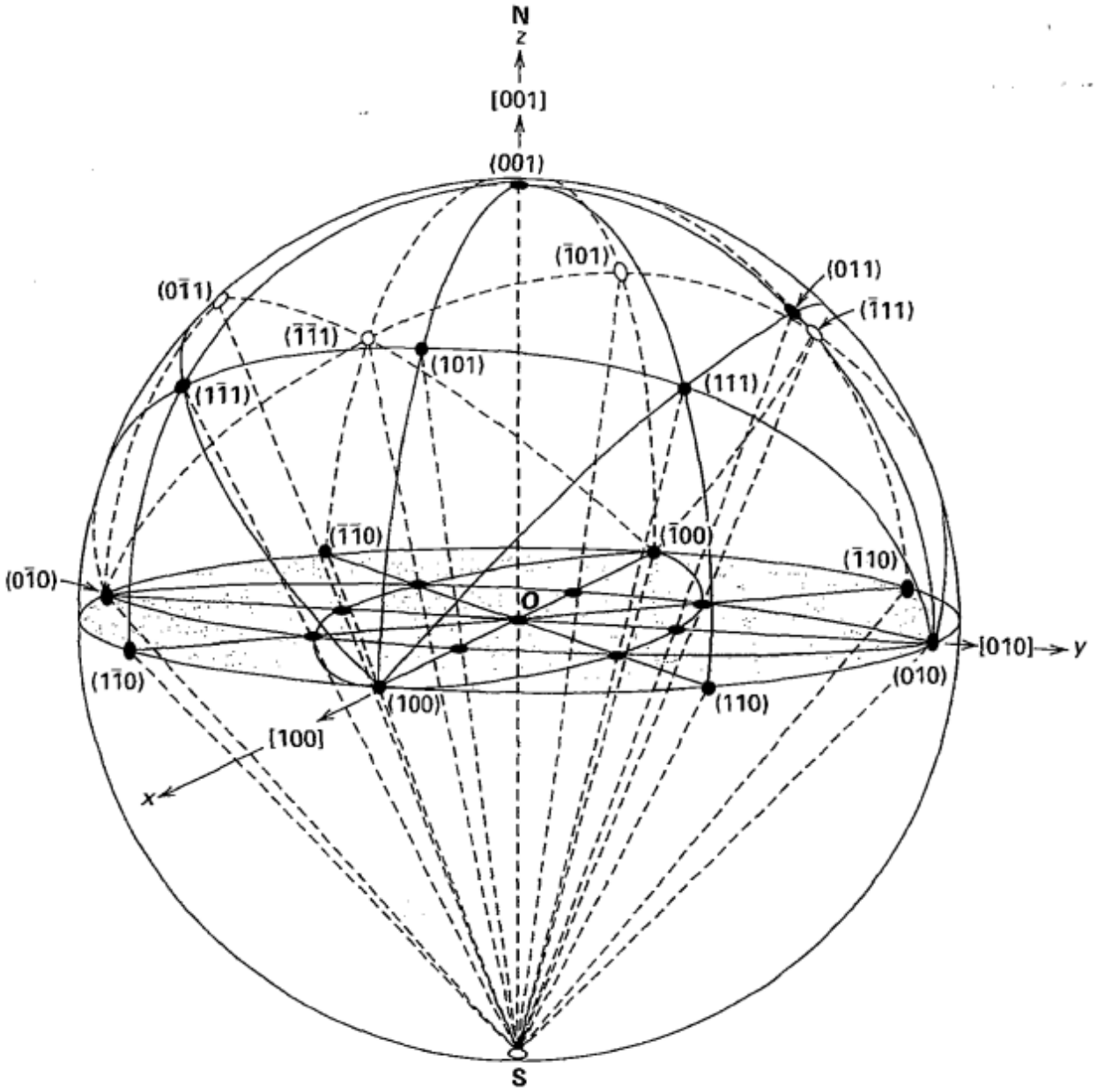



**FIGURA 8.3** Relações entre as projeções esférica e estereográfica (para o cristal da Fig. 8.1). Os polos das faces são mostrados somente no hemisfério norte, com seus correspondentes "pontos perfurantes" projetados sobre a projeção estereográfica – o plano equatorial sombreado. *O* marca o centro do cristal, como nas Figs. 8.1 e 8.4. As linhas tracejadas que conectam os polos das faces ao polo sul são utilizados para localizar suas interseções com o plano equatorial. (Conforme Wahlstrom, E.E. 1951. *Optical crystallography*. Wiley, New York.)

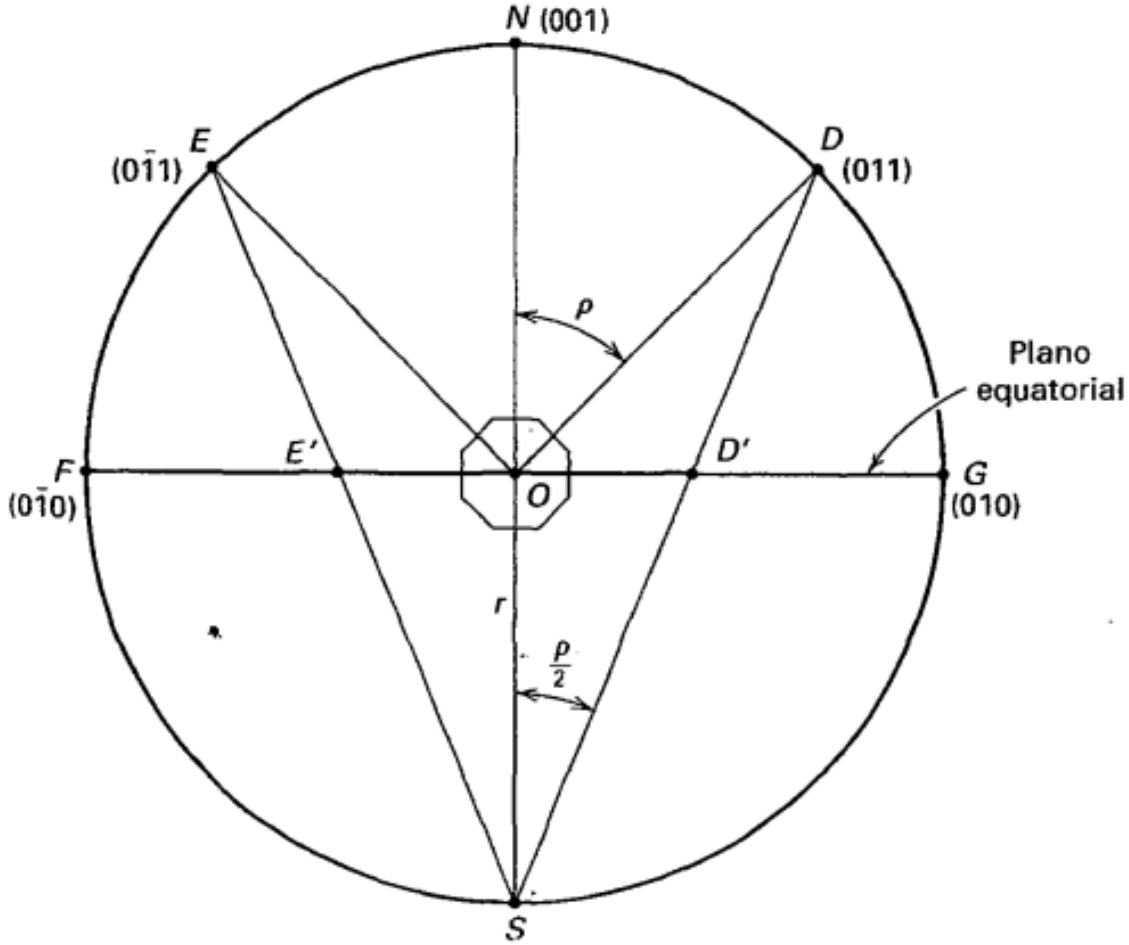



**FIGURA 8.4** Seção vertical através da esfera de projeção (como na Fig. 8.3) mostrando a relação entre os polos esférico e estereográfico.

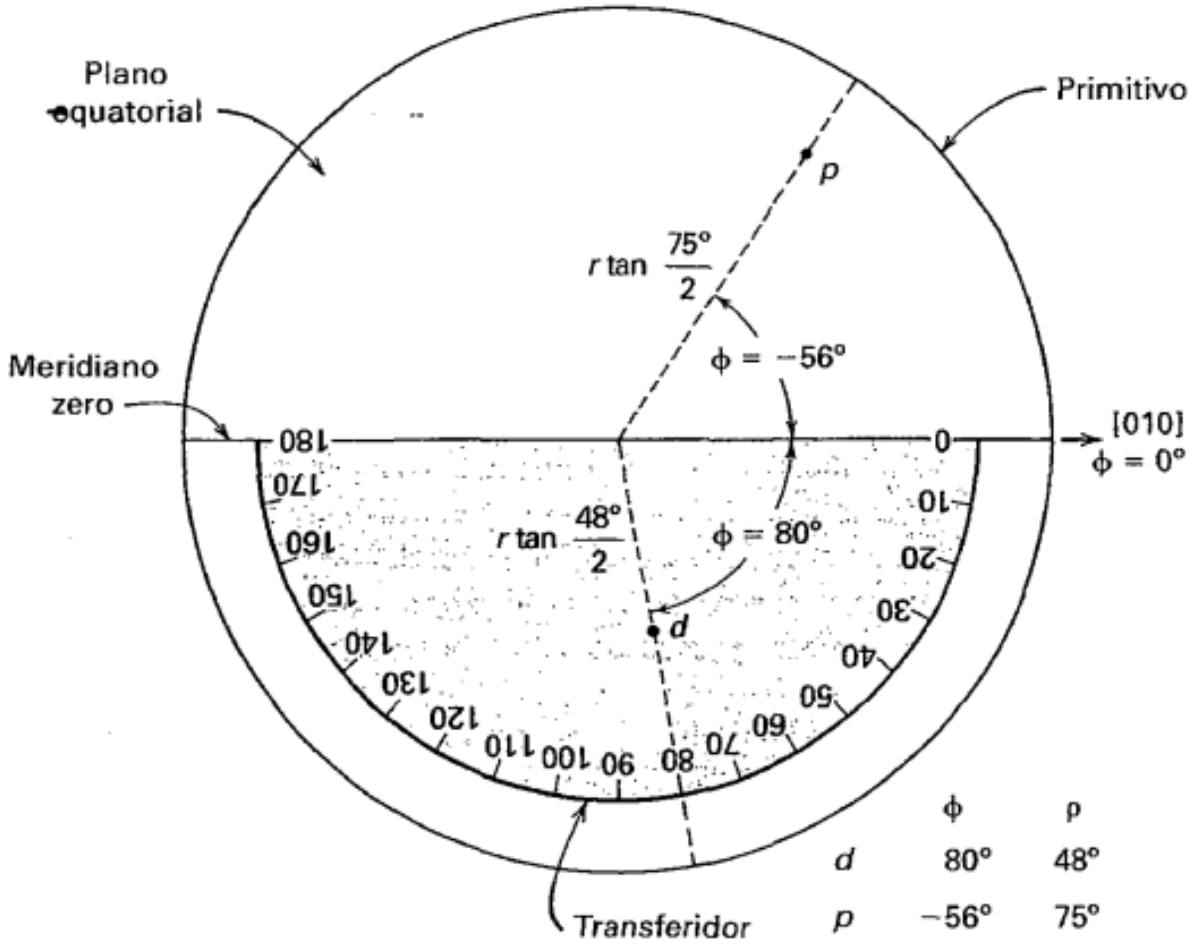
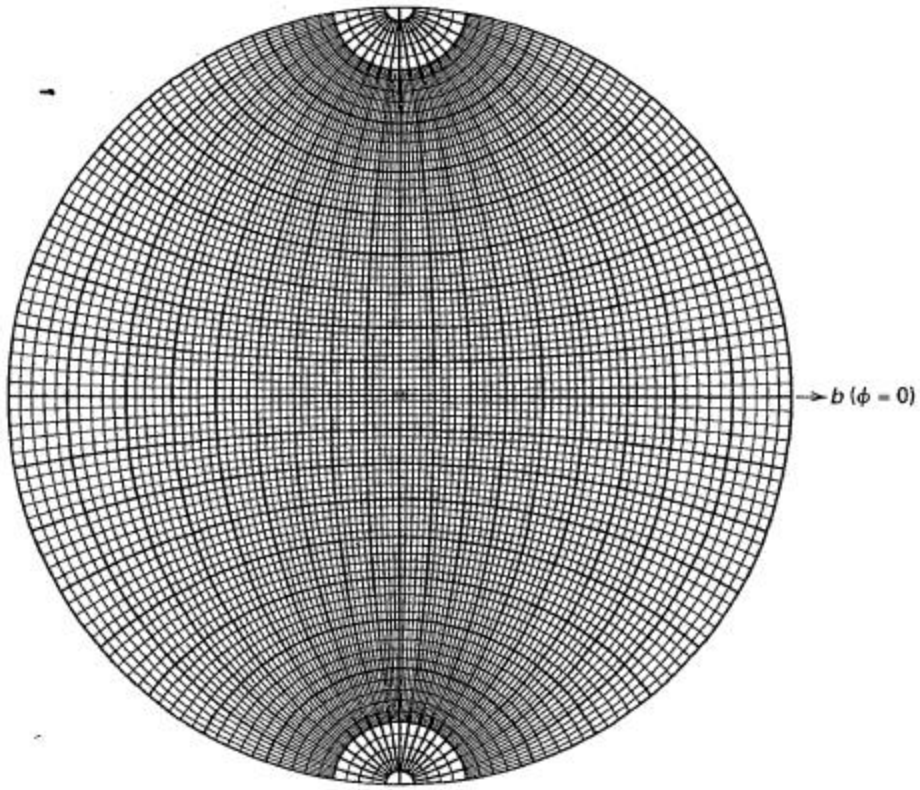



**FIGURA 8.5** Localização dos ângulos $\phi$ e $\rho$ de dois polos, para uma projeção estereográfica das faces cristalinas mostradas na Fig. 8.1. O "meridiano zero" é a linha que bissecta o círculo. O círculo representa o plano sombreado (equatorial) da Fig. 8.3.

- **Rede de Wulff**



- Referências:


- **SCHOENFLIES, Arthur Moritz.** *Arthur Moritz Schoenflies*. In: *Wikipedia: a enciclopédia livre*, [S.l.], 17 abr. 1853–27 mai. 1928. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Arthur_Moritz_Schoenflies. Acesso em: 19 jun. 2025.
- **WIKIPEDIA.** *Schoenflies notation*. In: *Wikipedia: The Free Encyclopedia*. [S.l.], [s.d.]. Disponível em: https://en.m.wikipedia.org/wiki/Schoenflies_notation. Acesso em: 19 jun. 2025.
- **KLEIN, Cornelis; DUTROW, Barbara.** *Manual of Mineral Science*. 23rd ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 20 fev. 2007. 716 p. ISBN 978-0471721574